

H30-

BH, BeH₂, NH₃, CH₃⁻, OH₃⁻

(kb. mer. porem)

1975

IX-4894

Ahlrichs R., Driessler F., Lischka H.,
Staemler V., Kutzelnigg W.,
J. Chem. Phys., 1975, 62(4),
1235-47.

PNO and CEPA-PNO calculations
of molecular systems. II. Molecules
beryllium hydride, borane ...

C. S. 1975.82v24.160461x. 10 10 (⊕)

H_3O^-

1983

Mahajan Geeta D.,
Deb B. M.

Рацем
реакция,
смысл.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20, № 6,
453-462.

●
(C. Li B₂⁺; III)

OH_3^-

[Om. 23 388]

1986

Cremer D., Kraka E.,

молекуляр.
спектр.,
ab initio
расчет.

J. Phys. Chem., 1986,
90, N 1, 33-40.



OH_3^+

[om. 24895a"]

1986

Gremer D., Kraka E.,

geom. and stability
of FH_2^+ , OH_3^+ , NH_4^+ and CH_5^+
in the gas phase.

Eleventh Austin Sympo
sium on Molecular Structure,

Austin, 1986.

H_3O^-

1987

#10 Б1106. Экспериментальное обнаружение двух стабильных структур иона H_3O^- в газовой фазе. Preliminary experimental evidence of two stable structures for the H_3O^- ion in the gas phase. Griffiths W. J., Harris F. M. «Org. Mass Spectrom.», 1987, 22, № 12, 812—814 (англ.)

Двумя способами на масс-спектрометре ZAB-2F получены ионы состава H_3O^- . В первом эксперименте вода вводилась в источник ионов вместе с Ag при давл. $2 \cdot 10^{-5}$ Торр с последующей ионизацией смеси. Во втором — смесь (3:1) CH_2O и H_2O подавалась в источник, в к-рый напускали NH_3 до появления H_3O^- (общее давл. 10^{-5} Торр). Анализ распада ионов H_3O^- показывает наличие общих путей (образование H_2O^-

М.П.

Х. 1988, 19, № 10

и OH^-); соотношения к-рых существенно различны. Ионы, полученные первым способом, более устойчивы. Основной путь их диссоциации приводит к H_2O^- . На основании этого им приписана циклич. структура. Наиболее вероятной структурой H_3O^- , получаемых вторым способом, считается $\text{HO}^- \cdots \text{H} - \text{H}$. Д. В. Загоревский

H_3O^-

DM. 28387

1987

108; 210318) Preliminary experimental evidence of two stable structures for the H_3O^- ion in the gas phase. Griffiths, W. J.; Harris, F. M. (Mass Spectrom. Res. Unit, Univ. Coll. Swansea, Swansea, UK SA2 8PP). *Org. Mass Spectrom.* 1987, 22(12), 812-14 (Eng). A review of authors own and related work is given with 6 refs. with discussion of mass spectroscopic evidence for 2 structures of H_3O^- .

структ.,
ионизм.,
масс спектры

С.А. 1988, 108, n 24

H_2O^-

(DM. 30989)

1988

DM. 30924

Gutowski M., Simons J. et al.,

ab initio
расчет,
эмпирич.,
сравнение.

J. Phys. Chem. 1988,

92, N 22, 6179-6182.

H_3O^-

(011 31482)

1989

8 Д41. Исправленная интерпретация результатов, полученных при экспериментальном исследовании структуры иона H_3O^- . Amended interpretation of the results obtained in an experimental investigation of the structure of the H_3O^- ion / Griffiths W. J., Harris F. M. // Int. J. Mass Spectrom. and Ion Process.— 1989.— 87, № 1.— С. R25.— Англ.

Опровергнута интерпретация результатов масс-спектрометрич. исследования, выполненного ранее авторами (// Org. Mass. Spectrom.— 1987.— 22.— С. 812). Отмечено, что приведенное ранее заключение о регистрации в масс-спектре иона $H_3^{16}O^-$ является ошибочным и на самом деле был зарегистрирован ион $^{18}OH^-$. Указано, что сделанные в предыдущей работе выводы о структуре ионов H_3O^- и H_3O^+ являются неверными. А. И. К.



и.п.

(11)

ср. 1989, № 8

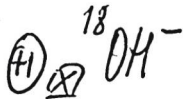
H_3O^-

OM. 31482

1989

Структура

110: 124515f Amended interpretation of the results obtained in an experimental investigation of the structure of the hydrogen oxide (H_3O^-) ion. Griffiths, W. J.; Harris, F. M. (Mass Spectrom. Res. Unit, Univ. Coll. Swansea, Swansea, UK SA2 8PP). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* 1989, 87(1), R25 (Eng). The ion previously described as $H_3^{16}O^-$ (G., H., 1987 and 1988) is, in fact, $^{18}OH^-$. The previous conclusion that H_3O^- has 2 stable structures is incorrect.



C.A. 1989, 110, 214

ОН₃⁻

1989

/ 17 Б1058. Энергии ионизации изомеров ОН₃². Ionization energies of ОН₃⁻ isomers / Ortiz J. V. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 11.— С. 7024—7029.— Англ.

Методами многочастичной теории возмущений второго порядка в валентно-расщепленном базисе 6—311 ГФ с добавлением поляризац. и диффузных ф-ций определены стационарные точки на потенциальной ПВ аниона ОН₃⁻. Найдены две почти равные по энергии структуры, к-рые м. б. описаны как Н₂О...Н⁻, Н₂...ОН⁻, а также структура симметрии С_{3v}, представляющая систему с двумя электронами на ридберговой орбитали а. Энергия этой структуры на 1,7 эВ выше энергии первых двух. В рамках пропагаторной техники определены энергии ионизации для найденных стационарных точек: 1,50, 2,27 и 0,43 эВ соотв. Определены также равновесные геометрич. параметры соотв-щих стационарных точек нейтр. системы ОН₃, что позволило оценить для всех трех структур адиабатич. энергии ионизации ОН₃⁻: 1,24; 2,14 и 0,42 эВ. Вычислены также гармонич. частоты колебаний вблизи каждой из стационарных точек аниона. А. В. Немухин

М.Л.

х. 1990, № 17

ОН₃⁻

1989

10 Д118. Энергии ионизации изомеров ОН₃⁻. Ionization energies of ОН₃⁻ isomers / Ortiz J. V. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 11.— С. 7024—7029.— Англ.

Методом многочастичной теории возмущений 2-го порядка с использованием базисного набора 6-311 ГФ с добавлением поляризац. ф-ций рассчитаны изомеры иона ОН₃⁻. Найдено, что изомеры, отвечающие гидридизованной молекуле воды и взаимодействию гидроксил-аниона с Н₂, близки по энергиям, структура симметрии С₃ на 1,68 эВ менее стабильна. Определены энергии ионизации изомеров: для первого изомера эта величина составила 1,50 эВ, что согласуется с последними эксперим. данными, для второго — 2,27 эВ, для изомера с пирамидальной структурой — 0,43 эВ. Оптимизированы геометрич. параметры соответствующих нейтральных систем и определены адиабатич. потенциалы ионизации.

С. А. Богданова

М.П.

ср. 1990, № 10

ОН₃ -

1990

3 Б1030. Структура и свойства анионов с двумя ридберговскими электронами. Structures and properties of double-rydberg anions / Ortiz J. V. // J. Phys. Chem. — 1990.— 94, № 12.— С. 4762—4763.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП в базисах $6-311++$ $++G(d, p)$ для атомов 3-го периода и в базисе $6-31++G(d, p)$ для атомов 4-го периода проведены расчеты с оптимизацией геометрии анионов OH_3^- (I), NH_4^- (II), PH_4^- (III), SH_3^- (IV), FH_2^- (V) и ClH_2^- (VI), к-рые м. б. рассмотрены как состоящие из соотв-щих катионов с закрытой оболочкой и двух электронов, занимающих диффузную орбиталь ридберговского типа. Ионы I—III являются стабильными, первый из них имеет пирамидальную структуру, два др. — тетраэдрич. Вертикальные ПТ ионизации этих ионов равны $\sim 0,4$ эВ. Оптимизир. конфигурация ионов IV—VI отличается от конфигурации нейтр. молекул: IV имеет симметрию D_{3h} , длины связей S—H равны 1,554 А. Ионы V и VI имеют симметрию $D_{\infty h}$; длины связей F—H и Cl—H равны 1,252 и 1,6355 А. Среди частот норм. кол. V и VI одна (σ_u) является мнимой, т. е. эти структуры отвечают переходному состоянию.

Э. Д. Герман

М.П.

(15)

X.1991, N 3

H₃O⁻

(OM 35339)

1990

Gutowski M., Simons J.,

J. Chem. Phys., 1990, 93, N 6,
3874-3880.

Double-Rydberg anions: ground-
-state electronic and geomet-
ric stabilities ●es.